

る。

以上より、非線形拡散方程式に基づくコンピュータシミュレーション法は、相分解を理解する上できわめて有用かつ有力であることがわかった。

Methods for Calculation of α - β Equilibria in Multi-component Titanium Alloys

By Hidehiro ONODERA *et al.*

比強度の高い超塑性 Ti 合金を設計するためには、一次 α 相の体積率および固溶強化度、および、旧 β 相の単位原子当たりの価電子数などの組織および組成因子を制御する必要がある。そのため、20 種類の多元系 Ti 合金における α 相と β 相の分析組成に基づいて、多元系 Ti 合金における α - β 相平衡の計算手法を開発した。手法の開発に用いた 20 合金に加えて、ほかの 8 合金について、 α 相の体積率および各合金元素の α 相と β 相への分配比を同手法により計算した結果、実測値と極めて良い一致を示した。これにより、同手法の計算精度が満足すべきものであることが確認された。さらに、これらの多元系 Ti 合金について、熱力学計算を行った結果、 α 相の体積率および各元素の両相への分配比に関する計算値は実測値と良く一致していた。これは、本研究で用いた一連のパラメーターにより、多元系の Ti 合金における α 相と β 相の相平衡の熱力学を記述できることを示すものと考えられた。

Computer Simulation of Phase Decomposition and Reversion Process in the FCC Ising Model

By Hiroshi OKUDA *et al.*

FCC 格子上でカイネティックイジングモデルにより、二元合金の復元過程の計算機シミュレーションを行った。得られた原子配置から構造関数、析出物の平均組成や平均半径の変化を調べ、これらの変化を Al-Zn 合金の G.P. ゾーンの復元過程に対する放射光小角散乱 (SR-SAXS) の実験結果と比較検討した。シミュレーションにおける構造変化は小角散乱実験と良い対応を示し、復元過程が析出物内部の溶質濃度低下を特徴とする初期過程と、析出物が溶けて縮む後期過程に分かれることが明らかになった。さらに復元および粗大化過程の時間スケールについても活性化エネルギーを Al 中の Zn と同程度にとることによつて実験と定性的に一致した。

Grain Boundary and Grain Growth

Review

Computer Simulation of Texture-controlled Grain Growth

By ABRUZZESE *et al.*

Based on the LSWH model a general statistical theory of grain growth in polycrystalline materials was developed which allows to take into account texture and drag effects. In the present paper by introducing an orientation dependence of grain boundary energy and mobility the texture effects were

investigated analytically and numerically. It is shown that, very generally, grain growth leads to pronounced texture changes which are accompanied by characteristic changes of the scattering of the grain size distribution and by peculiarities of the grain growth kinetics, which then not even approximately follow a $t^{1/2}$ -law. It then only depends on the inserted values of the parameters, whether the grain growth assumes the appearance of continuous grain growth or of secondary recrystallization. Computer simulations in a simplified case of only two textural components, which is frequently found experimentally in grain growth, are shown. This simplification allowed also a comparison with the (few available) experimental data. This led to good qualitative agreement and by fitting the theoretical to the experimental curves allowed even a quantitative evaluation of the involved parameters. Some noticeable experimental results will be discussed in this framework.

Research Articles

Comparison of Alloy Element Partition Behavior and Growth Kinetics of Proeutectoid Ferrite in Fe-C-X Alloys with Diffusion Growth Theory

By Masato ENOMOTO.

9 種類の Fe-C-X 合金 ($X = \text{Al, Si, V, Cr, Mn, Co, Ni, Cu}$ および Mo) において、初析フェライトの成長に伴う合金元素 (X) の分配に関する文献中のデータを、移動界面ですべての構成元素の平衡が成立とする局所平衡 (LE) の理論と、炭素の局所平衡のみが成立とするパラ平衡 (PE) の理論との比較を行った。フェライト生成が合金元素の分配を伴って起こる温度範囲と、分配を伴わないで起こる温度範囲は前者の理論により定性的に説明できる。各合金中の分配挙動を合金元素の熱力学的性質から考察した。Mn あるいは Ni の含有量が多くなると、分配挙動は低温で局所平衡理論から大きくずれるようになる。そのような合金で実際に分配が起こらなくなる温度を推定する方法を検討した。合金元素の分配を伴ったフェライトとそうでないフェライトの成長速度を簡単に概観した。オーステナイト中で炭素と強い親和力を有する Cr, Mn および Mo などを含む合金では成長速度は局所平衡とパラ平衡の双方から顕著にずれているが、この理由はまだ十分解明されていない。

Theoretical Calculations of the Structures and Energy of the $\Sigma=5$ Tilt Grain Boundary in Silicon

By Masanori KOHYAMA *et al.*

Si 中の $\Sigma=5(1\bar{3}0)$ 対称傾角粒界の構造とエネルギーが理論的に計算された。計算方法として、価電子力場近似法、結合軌道模型、およびスーパーセル法を用いた半経験的強結合近似法が用いられ、計算結果の比較を行った。すべての計算結果は、Bacmann らによる粒界構

造モデルの方が Hornstra によるモデルよりもエネルギー的に有利であることを示しており、また、このモデルの最適の二粒子間相対変位は、 $\langle 001 \rangle$ 軸方向にそつて約 $\frac{1}{8}a_0$ で特徴づけられる。こうした結果は、Ge 双晶における観察結果とよく一致している。しかしながら、粒界エネルギーの計算値については、各計算方法ごとに違いがある。弾性定数を再現するようにパラメーターをあわせた価電子力場ポテンシャルによるエネルギー計算値と、結合軌道模型によるエネルギー計算値は、ともに高く見積もられすぎている。一方、格子変位の有限な波数モードにあわせたパラメーターによる価電子ポテンシャルのエネルギー計算値は、半経験的強結合近似法の結果と同程度であった。

Atomistic Computer Simulation Studies on the Grain Boundary Properties of Nickel-Aluminate and Silicon

By Kin-ichi MASUDA-JINDO.

原子軌道の線型結合 (LCAO) 法を用いて金属 (Li_2 型構造の Ni_3Al 化合物) および半導体 (Si) 結晶の粒界の構造とその性質について調べた。特に粒界の原子配列、不純物原子の偏析エネルギーおよび破壊強度等の計算が行われた。体系の全エネルギーはバンド構造エネルギーと短範囲の反発力ポテンシャルエネルギーの和にかけて計算した。バンド構造エネルギーの計算には s , p , および d 軌道を基底関数にとつたりカージョン法を用いた。各軌道のエネルギー準位は各原子において電気的中性条件を用いて決定した。反発力ポテンシャルの導出には金属間化合物と半導体結晶の結合力の差を考慮して異なつた定式化を用いた。すなわち金属間化合物に対しては Poudolocky-Pettifor の定式化を半導体結晶に関しては拡張ヒュッケル理論を用いた。本研究で得られた LCAO 電子論による計算結果は粒界の基本的性質を議論し、また、粒界に関する種々の実験結果を解釈する上で非常に有用である。

Solidification and Others

Research Articles

Molecular Dynamics Study of $\text{Li}_2\text{O-SiO}_2$ Melts and Glasses

By Norimasa UMESAKI *et al.*

分子動力学法により Li_4SiO_4 融体ならびにガラスのシミュレーションを行つた。得られた Li_4SiO_4 融体とガラスの構造は、ラマンならびに X 線構造解析のデータとの比較の結果、現実の構造を再現していると考えられる。得られた相関関数は、X 線構造解析から得られた相関関数と良く一致していた。さらに、得られた結果は、 Li_4SiO_4 ガラスが 2, 3 の孤立した珪酸塩陰イオンからできていることを示した。

A Latent Heat Method for Macro-Micro Modeling of Eutectic Solidification

By C. S. KANETKAR *et al.*

Two different numerical methods were used to si-

mulate the solidification of eutectic alloys. The first one was the classical approach based on an implicit, one dimensional, axisymmetric finite difference method (EUCAST program), while the second one involved a two dimensional control volume implicit scheme with a boundary condition describing the heat flux at the casting-mold interface (BAMACAST program). To account for the heat evolution term in the conductivity equation, an original latent heat approach was introduced, consisting of the calculation of the latent heat evolved by the fraction of solid formed as a function of time. In turn, the fraction of solid has been calculated based on nucleation and growth kinetics. The heat transfer coefficient used for simulation was determined based on an analytical approach for hollow cylinders.

Gray cast iron and aluminum-silicon alloys of eutectic and hypoeutectic composition were used for the validation experiments. Cylindrical bars of different diameters were poured and the cooling curves were recorded at various locations in the metal and the mold. Experimental and computed data were compared, with excellent results for solidification time, undercooling, width of the mushy zone and heat transfer coefficient.

Molecular Dynamics Study of Homogeneous Nucleation and Growth in a Metal Liquid

By Kazuo TSUMURAYA *et al.*

一定体積の下における分子動力学法を用いて、864 個より成る液体ナトリウムからの核形成成長過程を調べる。381 K における平衡液体をその融点より 190 K 低い温度へ急冷する。同過程を原子の平均自乗変位、ポテンシャルエネルギー、動径分布関数を用いて評価する。過冷却液体は体心立方格子へ結晶化する。核形成の臨界原子数は 43 個以上であり、これは古典的核形成理論による予測値と矛盾しない。固液界面エネルギーは粒径とともに増加することを認めている。結晶成長速度は 187 ms^{-1} であり、従来の理論による予測値よりも著しく大きい。

Heat Source Model in Arc Welding and Evaluation of Weld Heat-affected Zone

By Akira OKADA *et al.*

アーク溶接における溶接部近傍の熱サイクルを熱伝導計算によつて推定するための熱源モデルに関し、溶融池でのプラズマ気流や溶融金属流による熱伝達に対応するような線分熱源セグメントの組合せによる骨格状の熱源モデルが提案され、その詳細が次の機能をもつパーソナル・コンピューター・システムでの繰返し処理によつて決定できることを明らかにした：

- (I) 溶融池現象に関する定性的知識や実用を考慮した単純化を基に、線分熱源セグメントの概略の構成、
- (II) 重回帰分析による各線分セグメントの熱サイクル曲線に及ぼす影響の評価、

(Ⅲ) 残差の分布状態と各セグメントによる温度上昇の最大値に達する時間からの各セグメントの適合性の判定。

ここで得られた結果から、従来から測定されている溶融池の代表寸法データを利用して、与えられた条件に対する熱源モデルを決定できる。

さらに、溶接用 CCT 図のデータ・ベースを用いて、熱影響部の硬さや組織の推定および適正溶接条件の選定のためのシステムの検討がなされた。

Atomic Features of the Interaction between a Screw Dislocation and Self-interstitial Atoms in Model Iron and Vanadium Lattices

By Eiichi KURAMOTO *et al.*

鉄およびバナジウム中のらせん転位と格子間原子の応

力下での相互作用についてジョンソン-ウィルソンポテンシャルを用いて計算機シミュレーションを行った。格子間原子には〈110〉型と〈111〉型があるが両方の場合について計算を行った。マトリックス中では前者が安定構造であるがらせん転位芯では後者が安定構造であるため、運動転位が〈110〉型格子間原子に出会うと〈111〉型への変換が芯中で起こり、その結果3個のキンクが転位線上に生じることが明らかになった。そしてこれらのキンクは低い応力下でも転位線に沿って移動することが観察された。このことは低温照射による軟化現象を説明する有力な根拠を与えるものである。複格子間原子との同様な相互作用についての計算も行われバナジウムの場合の軟化現象の説明がなされた。

会員には「鉄と鋼」あるいは「Trans. ISIJ」のいずれかを毎号無料で配付いたします。「鉄と鋼」と「Trans. ISIJ」の両誌希望の会員には、特別料金 5,000 円の追加で両誌が配付されます。

第 75 回腐食防食シンポジウム

「工業材料の耐候性」

1. 主催 腐食防食協会
2. 協賛 日本鉄鋼協会, 他
3. 日時 昭和 63 年 9 月 22 日(火) 10:00~16:30
4. 場所 市ヶ谷 自動車会館大会議室(千代田区九段南)
5. プログラム
塗膜の耐候性: プラスチックの耐候性: 電気, 電子材料の耐候性: 構造用鋼の耐候性: ステンレス鋼の耐候性: 工業材料の耐候性試験法: 総合討論.
6. 問合せ先 (社)腐食防食協会
〒110 東京都台東区東上野 6-23-5 第二雨宮ビル TEL 03 (844) 3553

石炭の燃焼及びガス化, 石炭の熱分解, その反応と生成物, 石炭の液化, 選炭, 分析法, 微量成分等, その他)

5. 講演要旨原稿締切 昭和 63 年 9 月 30 日
6. 問合せ先 〒170 東京都豊島区東池袋 3-1-1 サンシャイン 60
新エネルギー総合開発機構
石炭技術開発室
担当 桑原
電話 03-987-9442
ファックス 03-981-1059

第 5 回 IEA 国際石炭科学会議

International Conference on Coal Science (ICCS)

1. 主催 IEA (International Energy Agency, 国際エネルギー機関)
2. 日時 昭和 64 年 10 月 23 日(月)~27 日(金)
3. 会場 京王プラザホテル(東京都新宿区)
4. テーマ 石炭利用技術の基礎研究
(石炭の構造及び特性, 石炭の基礎反応,

原子力分野における計算力学に関する国内シンポジウム

1. 主催 日本溶接協会
2. 後援 日本鉄鋼協会
3. 日時 昭和 63 年 10 月 28 日(金) 9:30~17:00
4. 場所 東京大学山上会館(本郷キャンパス内)
5. 参加費 8,000 円(テキスト代含む)
6. 定員 100 名
7. 問合せ・申込み先
〒101 東京都千代田区神田佐久間町 1-11
産報佐久間ビル(社)日本溶接協会
原子力研究委員会シンポジウム担当宛
(TEL. 03-257-1521 FAX. 03-255-5196)